

Angewandte Mathematik: Elementare Numerik  
Vorläufige Version

Dimitri Ovrutskiy

9. Juni 2011

## Inhaltsverzeichnis

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Vorwort</b>  | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Computerzahlen und ungenaue Berechnungen</b>                               | <b>4</b>  |
| 2.1      | Fehler-Beispiele aus der Praxis . . . . .                                     | 4         |
| 2.2      | Arten der Fehler . . . . .  | 4         |
| 2.3      | Fließpunkt- <i>Floating-Point</i> -Darstellung . . . . .                      | 5         |
| 2.4      | Fehler bei arithmetischen Operationen . . . . .                               | 6         |
| <b>3</b> | <b>Interpolation und Approximation</b>  | <b>7</b>  |
| 3.1      | Interpolationsaufgabe . . . . .   | 8         |
| 3.2      | Existenz und Eindeutigkeit der Lösung von der Interpolationsaufgabe . . . . . | 9         |
| 3.3      | Interpolation nach Lagrange . . . . .   | 10        |
| 3.4      | Fehlerabschätzung bei Interpolation . . . . .                                 | 12        |
| 3.5      | Interpolation nach Newton . . . . .   | 14        |
| 3.6      | Aitken-Neville Algorithmus . . . . .  | 18        |
| 3.7      | Interpolation mit Splines . . . . .   | 20        |
| <b>4</b> | <b>Hermite-Interpolation</b>  | <b>22</b> |
| 4.1      | Trigonometrische Approximation . . . . .                                      | 23        |
| <b>5</b> | <b>Gleichungen mit einer Veränderlichen<br/>(Nullstellenbestimmung)</b>       | <b>24</b> |
| 5.1      | Bisektionsverfahren (Intervallhalbierungsverfahren) . . . . .                 | 24        |
| 5.2      | Banach'sche Fixpunkt-Iterationsverfahren . . . . .                            | 25        |
| 5.3      | Newton-Raphson-Verfahren zur Nullstellenbestimmung . . . . .                  | 30        |
| <b>6</b> | <b>Numerische Quadratur (numerische Integration)</b>                          | <b>33</b> |
| 6.1      | Ober- bzw. Untersummen . . . . .  | 33        |
| 6.2      | Mittelpunktsregel . . . . .   | 34        |
| 6.3      | Zusammengesetzte Sehnentrapezregel . . . . .                                  | 35        |
| 6.4      | Simpson-Regel oder Keplersche Fassregel . . . . .                             | 36        |
| 6.5      | Beispiele . . . . .   | 37        |
| 6.6      | Tabelle zu Quadraturformeln . . . . .   | 39        |
| <b>7</b> | <b>Lineare Regression (Methode der kleinsten Quadrate)</b>                    | <b>40</b> |
| <b>A</b> | <b>Anhang</b>   | <b>48</b> |

## 1 Vorwort

Bei der Gestaltung meiner Vorlesung (und beim Verfassen des Skriptes) habe ich mich an die von Hr. Prof. Dr. H. Salzmann an der HTW des Saarlandes gehaltenen Vorlesungen 'Mathematik 3 PI/B' (s. Vorlesungsmitschrift von Kim Meiser) und 'Praktische Mathematik PI/B', die von Hr. Prof. Dr. S. Rjasanow an der Universität des Saarlandes gehaltenen Vorlesung 'Praktische Mathematik' sowie 'Programmieren für Mathematiker' von Ralf Kirsch (Universität des Saarlandes) orientiert. Außerdem wurde das Script 'Numerische Methoden' von W. Kley benutzt.

"Numerik ist ein Teilgebiet der Angewandten Mathematik und beschäftigt sich damit, möglichst genaue und schnelle Algorithmen zur Lösung mathematischer Probleme zu konstruieren.

Im Grunde schließt die Numerik die Lücke zwischen der realen Welt und der perfekten Welt mathematischer Objekte. So kann man irrationale Zahlen nicht mit der begrenzten Zifferanzahl von Maschinenzahlen darstellen, wir arbeiten also schon zu Beginn einer Rechnung meist nur mit Näherungen der Werte, mit denen wir eigentlich rechnen wollen. Die Numerik leistet nun zwei wesentliche Beiträge zum Lösen dieser alltäglichen Probleme mit unserer unvollkommenen Zahlenwelt, der Maschinenzahlen. Erstens liefert sie ein Instrumentarium zur Beobachtung und Analyse von Fehlern während einer Rechnung, und zweitens untersucht sie mit Hilfe dieser Fehleranalyse die unterschiedlichen Lösungswege mathematischer Probleme auf Vor- und Nachteile im Umgang mit Maschinenzahlen."

**"Offensichtlich" ist das gefährlichste Wort in der Mathematik.**<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Eric Temple Bell, Mathematiker, 1883-1960

## 2 Computerzahlen und ungenaue Berechnungen

Analyse numerischer Rechnungen:

- Welche möglichen Fehler?
- Einfluss auf Endergebnis?

### 2.1 Fehler-Beispiele aus der Praxis

- Ariane 5  
Explosion im Juni 1996 aufgrund Softwarefehlers:  
64 bit Floating Point  $\Rightarrow$  16 bit Integer  $\Rightarrow$  Zahl größer als 32767
- Patriot Missile Failure  
Golfkrieg, Februar 1991, Zeitberechnung in 24 bit Register:  
0.32 sec falsch  $\Rightarrow$  1 km daneben  $\Rightarrow$  28 Tote, 100 Verletzte
- Mars Lander Mariner 1  
Fortran Loop: DO 5 K=1.3 anstatt DO 5 K=1,3  
Der Rechner initialisiert Variable namens DO5K mit 1.3  
Problem: Blanks, keine Deklaration notwendig, kein END DO
- ROSAT  
Röntgen Satellit (MPE Garching) 1997  
Rundungsfehler "unfortunate combinatio"  $\Rightarrow$  Pointing ungenau

### 2.2 Arten der Fehler

Wir werden drei Arten der Fehler unterscheiden:

1. Fehler in Anfangsdaten, *initial data error*
  - idealisierte Annahmen (Vereinfachungen)
  - ungenaue Messdaten
  - Kopierfehler (von Zahlen), Übertragungsfehler
  - genäherte Darstellung von Konstanten (wie  $\pi$  oder  $e$ )
2. Abschneidefehler, *truncation error*
  - charakteristisch für benutzte Methode (Algorithmus): liegt in der Hand des Realisateurs/Programmierers
  - z.B. bei approximativen mathematischen Techniken, Diskrete Modellierung  
Bspl.: MacLaurin Folge  $e^x = 1 + x + x^2/2 + \dots + x^n/n! + \dots$   
Berechnung einer Zahl, die  $e^\beta$  approximiert:  
 $e^\beta = 1 + \beta + \beta^2/2 + \dots + \beta^k/k! + E$ , wobei  $E$  der Abschneidefehler ist.  
Ursache: endliche Zahl der Iterationen/Termen

3. Rundungsfehler, *round-off or rounding error*  
Endliche Stellenzahl bei numerischen Rechnungen  
D.h. Zahlen und Ergebnisse können nicht exakt dargestellt werden

Bemerkungen:

- a) 2. existiert sogar auf Computer mit unendlicher Genauigkeit
- b) 3. betrifft alle Rechenschritte
- c) *ill-conditioned*: beliebig kleiner Fehler in Anfangsdaten  $\rightarrow$  großer Fehler in Ergebnissen
- d) Fehlerbeschreibung:  
sei  $\tilde{x}$  die berechnete Lösung zu 'wahren' Wert  $x$ , dann ist  
 $x - \tilde{x}$  der absolute Fehler  
 $(x - \tilde{x})/x$  der relative Fehler
- e) *Errorbound*: max. möglicher Fehler  
Wichtig bei vielen numerischen Methoden. Berechneter Fehler typischerweise kleiner als berechneter *Errorbound*.

### 2.3 Fließpunkt-*Floating-Point*-Darstellung

Jedes  $x$  wird durch  $\bar{x}$  dargestellt mit **Vorzeichen**, **Mantisse**, **Exponent**:  
Normalisierte Darstellung:

$$\bar{a} = \pm \underbrace{(0.a_1a_2\dots a_m)}_a \times b^c$$

mit  $|a| < 1 = b^0$ ,  $0 \leq a_i \leq b - 1$  und  $a_1 \neq 0$ , falls  $\bar{x} \neq 0$ .

Zum Beispiel  $153.12 \equiv 0.15312 \times 10^3$ .

$b$  bezeichnet die **Basis** der Darstellung:

- binär:  $b = 2$ , zwei 'digits'
- dezimal:  $b = 10$ , zehn 'digits'
- hexadezimal:  $b = 16$ , sechzehn 'digits'
- es gibt auch weitere Basen, die oft verwendet werden, wie  $b = 12$ ,  
 $b = 60$ ,  $b = 8$ ,  $b = 9$ ,  $b = 5$ , ...

Das hexadezimale System ist eine natürliche Erweiterung des Binärsystems.

## 2.4 Fehler bei arithmetischen Operationen

Sei  $\bar{x}$  eine Approximation an  $x$ , der Fehler ist  $e(x) = x - \bar{x}$ .

- Addition:

$$x + y = \bar{x} + e(x) + \bar{y} + e(y) = \bar{x} + \bar{y} + (e(x) + e(y))$$

Scheinbar ist der Gesamtfehler die Summe der Einzelfehler. I.A. ist es aber so, daß  $\bar{x} + \bar{y}$  nicht exakt darstellbar ist. Damit ergibt sich ein höherer Gesamtfehler:

$$e(x) + e(y) + \bar{x} + \bar{y} - \overline{\bar{x} + \bar{y}}$$

- Addition kann zu *overflow* führen
- Addition ist i.A. nicht assoziativ - Addition ist i.A. nicht kommutativ: bei mehreren Summanden sollen die kleinere zuerst addiert werden.

- Subtraktion:

- Multiplikation:

- Division:

Beispiele:  $\sum \frac{1}{k}$ ,  $1230 + 4 + 4$  in der Dreinachkommastellenarithmetik,  $(1 + 1/n)^n$ ,  $(\sqrt[n]{2})^n$

### 3 Interpolation und Approximation

Wer kann das nicht: nach einem Tag in Labor stapeln sich die Messdaten, man will diese verarbeiten und endlich die Theorie entkräften oder doch unterstützen... Es ist nur so, daß die Theorien operieren mit kontinuierlichen Daten, und die Ergebnisse der Messungen sind diskret; schlimmer, es gibt immer endlich viel davon, egal, wie oft das Versuch wiederholt wird!

Das bedeutet, wir brauchen ein Werkzeug, um endliche diskrete Daten kontinuierlich zu erweitern, und zwar so, daß der Abweichungsfehler von der "Originalfunktion", die wir nicht kennen, kontrollierbar klein wird, zumindest an einem gewissen vorgegebenen Intervall.

Diese Aufgabe zu lösen heißt "die Messdaten zu interpolieren".

Ein anderes Problem ist mit Interpolation eng verwandt. Der größte Teil der Gleichungen, die man lösen muss, um physikalische und industrielle Aufgaben zu bewältigen, und die nachweislich lösbar sind, besitzen keine symbolische Lösung. D.h. die (existierende!) Lösung läßt sich nicht in der Form  $y = f(x)$  schreiben. Die numerische Methoden zur Lösung dieser Gleichungen (die wir im Rahmen dieses Kurses nicht angehen werden, aber später, z.B. in der "Numerik und Statistik") lassen aber die Funktionswert an jeder vernünftigen Stelle berechnen, und somit eine Datentabelle beliebiger Dimension zu erstellen.

Manche Funktionen lassen sich zwar mit einer Formel aufschreiben, die Berechnung der Werte und die Behandlung der Funktion bei Durchführung 'normaler' mathematischer Operationen wie Integration oder Differentiation ist aber ziemlich mühsam. Oft braucht man aber nicht die exakte Formel, sondern die Möglichkeit, Funktionswerte schnell mit einer vorgegebenen Genauigkeit zu berechnen. Hier kann man die originale Funktion durch eine andere ersetzen, die sich von der Ausgangsfunktion auf dem Intervall der Interesse wenig (und kontrollierbar!) abweicht und viel einfacher zu behandeln ist, d.h., z.B., deren Stammfunktion und alle Ableitungen sind längst bekannt und leicht auszuwerten sind.

Diese zweite Aufgabe heißt "Approximation". Beherrscht man die Interpolationsverfahren, so hat man auch alles, um Approximation durchzuführen: man erstelle eine Datentabelle für die bekannte Funktion, und weiter interpoliere die Daten.

### 3.1 Interpolationsaufgabe

Motivation: Mögliche Fragestellung

$f : [a, b] \mapsto \mathbb{R}$  sei vorgegeben.  $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$  seien vorgegebene Punkte. Sei  $y_k = f(x_k)$ ,  $k = 0, \dots, n$ . Suche ein Polynom  $P : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $P(x_k) = y_k$  für  $k = 0, \dots, n$ .

(IP) Interpolationsaufgabe:

Gegeben seien die sog. *Stützstellen*  $x_0, x_1, \dots, x_n$  und die *Stützwerte*  $y_0, y_1, \dots, y_n$  mit der Eigenschaft  $x_i \neq x_k$  für  $i \neq k$  (paarweise verschieden).

Suche ein Polynom  $P : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $P(x_k) = y_k$  für  $k = 0, \dots, n$ .<sup>a</sup>

Also unsere leicht zu behandelnde Funktion, die an den Messstellen die vorgegebene Werte annimmt, soll womöglich ein Polynom sein.

Gibt es so ein Polynom?

Wenn ja, unter welcher Bedingungen?

Wie groß ist die Unterschied zwischen der unbekanntem Originalfunktion und dem interpolierenden Polynom, wenn es existiert?

Alle diese Fragen beantworten wir in dem nächsten Kapitel.

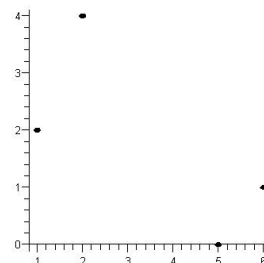


Abbildung 1:  
Interpolationsaufgabe (IP)

---

<sup>a</sup>D.h. man sucht ein Polynom, das die Punkte  $(x_n, y_n)$  miteinander verbindet.



### 3.2 Existenz und Eindeutigkeit der Lösung von der Interpolationsaufgabe

**Satz 3.1** *Es gibt genau ein Polynom vom Höchstgrad  $n$ , welches (IP) löst.*

**Beweis: 3.1**

Sei  $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$  ein solches Polynom.  
 Für  $p$  muss gelten:  $p(x_k) = y_k$  für  $k = 0, \dots, n$ .

$$\begin{aligned} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n &= y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n &= y_1 \\ &\vdots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_nx_n^n &= y_n \end{aligned} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \overbrace{1 \ x_0 \ x_0^2 \ \dots \ x_0^n}^{\mathbf{A}} \\ 1 \ x_1 \ x_1^2 \ \dots \ x_1^n \\ \vdots \\ 1 \ x_n \ x_n^2 \ \dots \ x_n^n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Ein quadratisches Gleichungssystem hat genau einen Lösungsvektor, wenn  $\det(\mathbf{A}) \neq 0$ .  $\mathbf{A}$  ist eine Vandermonde-Matrix. Im Fall  $n = 2$  führt die Laplace'sche Determinantenentwicklung auf

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{A}) &= \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & x_1^2 - x_0x_1 \\ 1 & x_2 - x_0 & x_2^2 - x_0x_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & x_1(x_1 - x_0) \\ 1 & x_2 - x_0 & x_2(x_2 - x_0) \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} x_1 - x_0 & x_1(x_1 - x_0) \\ x_2 - x_0 & x_2(x_2 - x_0) \end{vmatrix} = (x_2 - x_0)(x_1 - x_0) \begin{vmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \end{vmatrix} = (x_2 - x_0)(x_1 - x_0)(x_2 - x_1) \end{aligned}$$

(Aus einer 3x3 Vandermonde-Matrix wurde 2x2 Vandermonde-Matrix.)  
 Bei Übertragung dieser Methode auf eine allgemeine Vandermonde-Determinante erhält man

$$\det \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{pmatrix} = \prod_{\substack{k=1 \\ k>i}}^n (x_n - x_i) \neq 0 \quad \Bigg| \quad \neq 0 \text{ wegen } x_i \neq x_k \text{ für } i \neq k,$$

q.e.d.

### 3.3 Interpolation nach Lagrange

Da die Interpolationsaufgabe fordert, daß das Interpolationspolynom an den Stützstellen genau die Stützwerte besitzt, fuhr Joseph-Louis Lagrange (1736-1813) im Jahr 1783 spezielle Polynome ein. Diese sind so gebaut, daß jedes Lagrange-Polynom  $L_k(x)$ ,  $k = 0, \dots, n$  nur an einer einzigen Stützstelle  $x_k$  den Wert 1 annehmen, und an allen anderen Stützstellen 0 werden:

$$L_k(x_i) = 1 \text{ für } i = k$$

$$L_k(x_i) = 0 \text{ für } i \neq k.$$

Man muß sagen, die Methode, die wir Lagrange-Methode nennen und in diesem Kapitel besprechen, wurde eigentlich von Waring schon 16 Jahren vor Lagrange angeboten und publiziert (E. Waring, "Problems Concerning Interpolations", Philosophical Transactions of the Royal Society of London, vol. 69, 1779, pp. 59-67.)

Die  $L_k(x)$  sind nach Satz (3.1) Polynome vom Höchstgrad  $n$ . Mit diesen Polynomen ist

$$p(x) = y_0 \cdot L_0(x) + y_1 \cdot L_1(x) + \dots + y_n \cdot L_n(x)$$

Es ist  $p(x_k) = y_k$ .

Die Polynome

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n \frac{(x - x_i)}{x_k - x_i}$$

haben die gewünschte Eigenschaft.

Beispiel:

$$x_0 = 1, x_1 = 2, x_2 = 5, x_3 = 6$$

$$y_0 = 2, y_1 = 4, y_2 = 0, y_3 = 1$$

$$L_0(x) = \frac{(x-2)(x-5)(x-6)}{(1-2)(1-5)(1-6)} = -\frac{1}{20}(x-2)(x^2-11x+30) = -\frac{1}{20}(x^3-13x^2+52x-60)$$

$$L_1(x) = \frac{(x-1)(x-5)(x-6)}{(2-1)(2-5)(2-6)} = \frac{1}{12}(x-1)(x^2-11x+30) = \frac{1}{12}(x^3-12x^2+41x-30)$$

$$L_2(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-6)}{(5-1)(5-2)(5-6)} = -\frac{1}{12}(x-1)(x^2-8x+12) = -\frac{1}{12}(x^3-9x^2+20x-12)$$

$$L_3(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-5)}{(6-1)(6-2)(6-5)} = \frac{1}{20}(x-1)(x^2-7x+10) = \frac{1}{20}(x^3-8x^2+17x-10)$$

$$\Rightarrow p(x) = -\frac{1}{20}(x^3-13x^2+52x-60) - \frac{1}{3}(x^3-12x^2+41x-30) - \frac{1}{20}(x^3-8x^2+17x-10)$$

$$\Leftrightarrow p(x) = \frac{17}{60}x^3 - \frac{31}{10}x^2 + \frac{559}{60}x - \frac{9}{2}$$

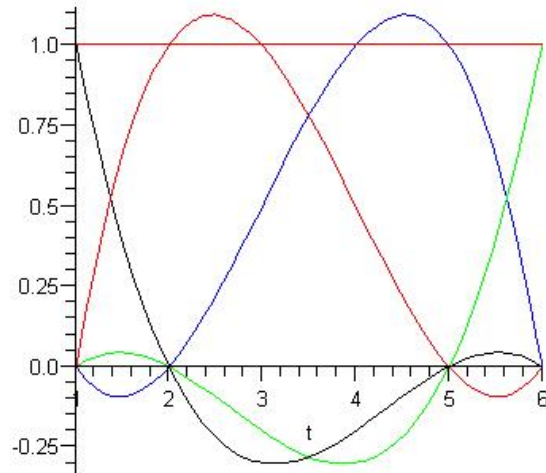


Abbildung 2: Lagrange-Polynome  $L_0(x) - L_3(x)$

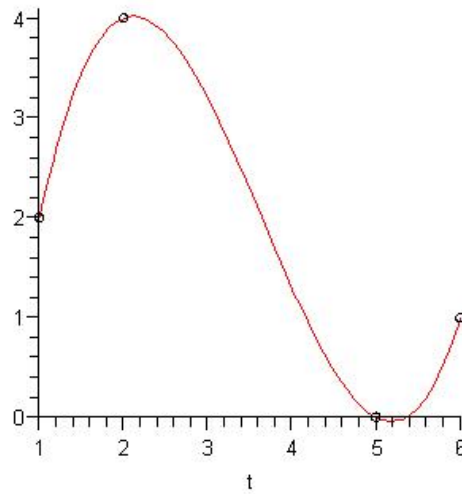


Abbildung 3: Lagrange-Interpolationspolynom  $p(x)$

### 3.4 Fehlerabschätzung bei Interpolation

Der Satz 3.1 garantiert, daß, unabhängig davon, wie wir das Interpolationspolynom berechnet haben, es eindeutig bestimmt ist.

Das heißt unter anderem, das die Fehlerabschätzung von der Gewinnungsmethode völlig unabhängig ist.

Wir werden die Lagrange-Methode benutzen, um die Abweichung des berechneten Interpolationspolynoms von der (in der Regel unbekannt!) Originalfunktion auf dem vorgegebenem Intervall abzuschätzen.

Motivation: Es geht bei der Fehlerabschätzung darum, eine Näherungsformel für den Fehler zu entwickeln, den man mit der Interpolation ( $\rightarrow$  Annäherung der Funktion mittels Polynom) macht.  $R(x)$  ist dabei die gesuchte Fehlerfunktion, die für jeden  $x$ -Wert die Differenz zwischen Näherung und tatsächlichem Wert angibt. Will man den maximalen Fehler abschätzen, muss man praktisch eine Extremwertaufgabe lösen.

Beispielaufgabe:

Stützstellen  $x_0, x_1, \dots, x_n$  mit  $x_i \neq x_k$  für  $i \neq k$

Stützwerte  $y_0, y_1, \dots, y_n$

Lösung nach Lagrange:

Für  $p(x) = \sum_{k=0}^n y_k \cdot L_k(x)$  mit  $L_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{x-x_j}{x_k-x_j}$

gilt:  $p(x_k) = y_k$  ( $k = 0, \dots, n$ )

Mit  $\omega(x) = \prod_{k=0}^n (x - x_k)$  lässt sich  $L_j(x)$  darstellen als

$$L_j(x) = \begin{cases} \frac{\omega(x)}{(x-x_j) \cdot \omega'(x_j)} & \text{für } x \neq x_j \\ 1 & \text{für } x = x_j \end{cases}$$

**Satz 3.2** Gegeben sind die  $n+1$ -mal in  $[a, b]$  stetig differenzierbare Funktion  $f$  und die Stützstellen  $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ .

Es sei  $y_k = f(x_k)$  ( $k = 0, \dots, n$ ).

$p$  sei das eindeutig bestimmte Interpolationspolynom vom Höchstgrad  $n$  mit  $p(x_k) = y_k$  ( $k = 0, \dots, n$ ).

Ist  $R(x) = f(x) - p(x)$  und  $\omega(x) = \prod_{k=0}^n (x - x_k)$ , so gilt:

Zu jedem  $x \in [a, b]$  gibt es ein  $c \in [a, b]$  mit

$$|R(x)| = |f(x) - p(x)| \leq \frac{1}{(n+1)!} \cdot f^{(n+1)}(c) \cdot \omega(x)$$

**Beweis: 3.2**

Sei  $x \in [a, b]$  fest,  $t \in \mathbb{R}$  variabel. Betrachte Hilfsfunktion

$$h(t) := f(t) - p(t) - \frac{f(x) - p(x)}{\omega(x)} \cdot \omega(t) \quad (t \neq x)$$

$h(t)$  ist  $n + 1$  - mal differenzierbar; es ist  $h(x_k) = 0$ ;  $h(x) = 0$ .

$h$  hat  $n + 2$  paarweise verschiedene Nullstellen.

$h'$  hat  $n + 1$  paarweise verschiedene Nullstellen.

$h''$  hat  $n$  paarweise verschiedene Nullstellen.

$\vdots$

$h^{(n+1)}$  hat eine einzige Nullstelle  $c$  in  $[a, b]$ .

$$0 = h^{(n+1)}(c) = f^{(n+1)}(c) - 0 - \frac{f(x) - p(x)}{\omega(x)} \cdot (n + 1)!$$

$$f^{(n+1)}(c) = \frac{f(x) - p(x)}{\omega(x)} \cdot (n + 1)!$$

$$R(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n + 1)!} \cdot \omega(x)$$

Mit  $\sup_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)| =: M_{n+1}$  erhält man

$$R(x) = |f(x) - p(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n + 1)!} \cdot |(x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n)|$$

### 3.5 Interpolation nach Newton

Andere Methode zur Berechnung des Interpolationspolynoms (eindeutig bestimmt!) hat Sir Isaac Newton 1675 erfunden. Er schrieb darüber in den Briefen an Smith (1675) und an Oldenburg (1676), publizierte sein Algorithmus in dem Buch *Methodus Differentialis* aber erst 1711.

Im gegensatz zu Lagrange 100 Jahre später, fuhr Newton keine speziell zu berechnende Polynome ein. Dafür definierte er ein matimatischer Objekt, das wir *dividierte Differenzen* nennen.

Sie die Interpolationsaufgabe gestellt wie folgt:

Stützstellen:  $x_0, x_1, \dots, x_n$  ( $x_i \neq x_k$  für  $i \neq k$ )

Stützwerte:  $y_0, y_1, \dots, y_n$

Zum Auffinden des Interpolationspolynoms wird der Ansatz

$$p(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \dots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1}),$$

der oft auch "Entwicklung nach Newton'sche Polynombasis" genannt wird, verwendet.

Es sind also die Koeffizienten  $a_0, \dots, a_n$  zu berechnen so, daß dieser Ansatz das Interpolationspolynom liefert.

Um  $a_0, a_1, \dots, a_n$  zu bestimmen, ist das Gleichungssystem

$$p(x_k) = y_k \quad (k = 0, \dots, n)$$

zu lösen.

$$\begin{aligned}
 p(x_0) &= y_0 \\
 p(x_1) &= y_1 = a_0 + a_1(x_1 - x_0) \\
 p(x_2) &= y_2 = a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) \\
 &\vdots \\
 p(x_n) &= y_n = a_0 + a_1(x_n - x_0) + a_2(x_n - x_0)(x_n - x_1) + \dots + a_n(x_n - x_0) \cdot \dots \cdot (x_n - x_{n-1})
 \end{aligned}$$

$$a_0 = y_0$$

$$y_1 = a_0 + a_1(x_1 - x_0) \Rightarrow \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = a_1;$$

$$\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} =: \underbrace{[x_1, x_0]}_{\text{dividierte Differenz}}$$

$$\begin{aligned}
 y_2 &= a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_1)(x_2 - x_0) \\
 &= y_0 + [x_1, x_0](x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 a_2 &= (y_2 - y_0 - [x_1, x_0](x_2 - x_0)) \cdot \frac{1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\
 &= \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot \left( \frac{y_2 - y_0}{x_2 - x_1} + \frac{y_1 - y_0}{x_2 - x_1} - [x_1, x_0] \cdot \frac{x_2 - x_0}{x_2 - x_1} \right) \\
 &= \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot \left( [x_2, x_1] + [x_1, x_0] \cdot \overbrace{\left( -\frac{x_2 - x_0}{x_2 - x_1} + \frac{x_1 - x_0}{x_2 - x_1} \right)}^{-1} \right) \\
 &= \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot ([x_2, x_1] - [x_1, x_0]) := [x_2, x_1, x_0]
 \end{aligned}$$

Wir definieren die **dividierten Differenzen** durch

$$[x_1, x_0] := \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

bzw.

**Definition 3.1**

$$[x_{k+1}, x_k] := \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k}$$

oder induktiv:

$$[x_m, x_{m-1}, \dots, x_0] := \frac{[x_m, x_{m-1}, \dots, x_1] - [x_{m-1}, x_{m-2}, \dots, x_0]}{x_m - x_0}$$

bzw.

$$[x_m, \dots, x_k] := \frac{[x_m, x_{m-1}, \dots, x_{k+1}] - [x_{m-1}, \dots, x_k]}{x_m - x_k}$$

Mit diesen dividierten Differenzen hat das Newtonsche Interpolationspolynom die Darstellung

$$\begin{aligned}
 p(x) = & y_0 \\
 & + [x_1, x_0] \cdot (x - x_0) \\
 & + [x_2, x_1, x_0] \cdot (x - x_0)(x - x_1) \\
 & + \vdots \\
 & + [x_n, x_{n-1}, \dots, x_0](x - x_0)(x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_{n-1})
 \end{aligned}$$

Schema zur Berechnung der dividierten Differenzen:

|          |             |                    |   |          |                                    |
|----------|-------------|--------------------|---|----------|------------------------------------|
| x        | y           |                    |   |          |                                    |
| $x_0$    | $y_0 = a_0$ |                    |   |          |                                    |
| $x_1$    | $y_1$       | $[x_1, x_0] = a_1$ |   |          |                                    |
| $x_2$    | $y_2$       | $[x_2, x_1]$       | $[x_2, x_1, x_0] = \frac{[x_2, x_1] - [x_1, x_0]}{x_2 - x_0} = a_2$ |          |                                    |
| $\vdots$ | $\vdots$    | $\vdots$           | $\vdots$  | $\ddots$ |                                    |
| $x_n$    | $y_n$       | $[x_n, x_{n-1}]$   | $\dots$   |          | $[x_n, x_{n-1}, \dots, x_0] = a_n$ |

Konkretes Beispiel mit den Punkten (1, 2), (2, 4), (5, 0), (6, 1):

|   |   |                |                 |                  |
|---|---|----------------|-----------------|------------------|
| x | y |                |                 |                  |
| 1 | 2 |                |                 |                  |
| 2 | 4 | 2              |                 |                  |
| 5 | 0 | $-\frac{4}{3}$ | $-\frac{5}{6}$  | $-\frac{17}{60}$ |
| 6 | 1 | 1              | $-\frac{7}{12}$ |                  |

$$a_0 = 2, a_1 = 2, a_2 = -\frac{5}{6}, a_3 = -\frac{17}{60}.$$

$$\begin{aligned}
 p(x) = & 2 \\
 & + 2(x - 1) \\
 & - \frac{5}{6}(x - 1)(x - 2) \\
 & - \frac{17}{60}(x - 1)(x - 2)(x - 5)
 \end{aligned}$$

Die Stützstellen müssen nicht in natürlicher Reihenfolge aufgeführt sein.

**Bei Hinzunahme einer weiteren Stützstelle kann das bereits berechnete Schema weiterverwendet werden.**

Nehmen wir zur Verdeutlichung den Punkt (4, 2) zum Beispiel hinzu:



| x | y |                |                 |                  |   |
|---|---|----------------|-----------------|------------------|---|
| 1 | 2 |                |                 |                  |   |
| 2 | 4 | 2              |                 |                  |   |
| 5 | 0 | $-\frac{4}{3}$ | $-\frac{5}{6}$  | $-\frac{17}{60}$ | ? |
| 6 | 1 | 1              | $-\frac{7}{12}$ | ?                |   |
| 4 | 2 | ?              | ?               |                  |   |

$$a_0 = 2, a_1 = 2, a_2 = -\frac{5}{6}, a_3 = -\frac{17}{60}, a_4 = ?.$$

$$\begin{aligned}
 p(x) &= 2 \\
 &+ 2(x-1) \\
 &- \frac{5}{6}(x-1)(x-2) \\
 &- \frac{17}{60}(x-1)(x-2)(x-5) \\
 &+ \frac{?}{?}(x-1)(x-2)(x-5)(x-6)
 \end{aligned}$$

Schema und Polynom bleiben erhalten und werden jeweils nur ergänzt.

Angenommen, man sucht jetzt das Interpolationspolynom durch die Punkte (1,2), (2,4), (5,0), (6,2); es heie  $q(x)$ .  $p(x)$  durch (1,2), (2,4), (5,0), (6,1) ist bekannt. Fur  $r(x) = p(x) - q(x)$  gilt

$$\begin{aligned}
 r(1) &= r(2) = r(5) = 0; \\
 r(6) &= p(6) - q(6) = -1 \\
 r(x) &= A \cdot (x-1)(x-2)(x-5) \\
 r(6) &= A \cdot 5 \cdot 4 \cdot 1 = -1 \\
 A &= -\frac{1}{20} \\
 q(x) &= p(x) - r(x)
 \end{aligned}$$

r nach Newton:

| x | y  |    |                |                 |
|---|----|----|----------------|-----------------|
| 1 | 0  |    |                |                 |
| 2 | 0  | 0  |                |                 |
| 5 | 0  | 0  | $-\frac{1}{4}$ | $-\frac{1}{20}$ |
| 6 | -1 | -1 |                |                 |

vgl. mit  $r(x) = A(x-1)(x-2)(x-5)$

### 3.6 Aitken-Neville Algorithmus

Stützstellen  $x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}$

Stützwerte  $y_0, y_1, \dots, y_n, y_{n+1}$

Sei  $p_1$  das Interpolationspolynom für  $x_0, x_1, \dots, x_n$ .

Sei  $p_2$  das Interpolationspolynom für  $x_1, x_2, \dots, x_{n+1}$ .

Dann ist

$$\begin{aligned}
 q(x) &= \frac{1}{x_{n+1} - x_n} \cdot \begin{vmatrix} p_1(x) & x_0 - x \\ p_2(x) & x_{n+1} - x \end{vmatrix} \\
 &= \frac{1}{x_{n+1} - x_0} \cdot ((x_{n+1} - x) \cdot p_1(x) - (x_0 - x) \cdot p_2(x)) \quad (1)
 \end{aligned}$$

das Interpolationspolynom für  $x_0, x_1, \dots, x_{n+1}$ .

$q$  ist ein Polynom vom Grad  $n + 1$ .

Für  $1 \leq k \leq n$  ist

$$\begin{aligned}
 q(x_k) &= \frac{1}{x_{k+1} - x_0} \cdot \begin{vmatrix} y_k & x_0 - x_k \\ y_k & x_{n+1} - x_k \end{vmatrix} = \frac{y_k}{x_{n+1} - x_0} \cdot (x_{n+1} - x_k - (x_0 - x_k)) = y_k \\
 q(x_0) &= \frac{1}{x_{n+1} - x_0} \cdot \begin{vmatrix} y_0 & 0 \\ p_2(x_0) & x_{n+1} - x_0 \end{vmatrix} = y_0
 \end{aligned}$$

ebenso  $q(x_{n+1}) = y_{n+1}$ .

Sei  $p_{k,k-1,\dots,m}$  das Interpolationspolynom für die Punkte  $x_k, x_{k-1}, \dots, x_m$ .

Nach der Formel 1 lässt sich das folgende Schema von Interpolationspolynomen berechnen:

|       |          |            |           |            |          |                |
|-------|----------|------------|-----------|------------|----------|----------------|
| $x_0$ | $y_0$    | $p_{01}$   |           |            |          |                |
| $x_1$ | $y_1$    | $p_{02}$   | $p_{012}$ | $p_{0123}$ |          |                |
| $x_2$ | $y_2$    |            | $p_{123}$ |            | $\ddots$ |                |
|       | $\vdots$ | $\vdots$   | $\vdots$  |            |          | $p_{0\dots n}$ |
| $x_n$ | $y_n$    | $p_{n-1n}$ | $\dots$   |            |          |                |

**Satz 3.3** Das Interpolationspolynom durch die Punkte  $x_0, x_1, \dots, x_n$  hat die Gestalt

$$\begin{aligned}
 p_n(x) &= y_0 + [x_1, x_0](x - x_0) + \dots + [x_n, \dots, x_0] \cdot (x - x_0)(x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n) \\
 &= y_0 + \sum_{k=1}^n [x_k, x_{k-1}, \dots, x_0] \cdot \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j) \quad (2)
 \end{aligned}$$

**Beweis: 3.3**

Induktionsanfang:  $n=1$ :  $p_1(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \cdot (x - x_0)$   
 $n \rightarrow n + 1$ : Das Interpolationspolynom durch  $x_0, x_1, \dots, x_n$  sei durch (2) gegeben. Das Interpolationspolynom durch  $x_1, \dots, x_{n+1}$  lautet

$$\tilde{p}_n = y_1 + \sum_{k=1}^n (x_{k+1}, \dots, x_1) \cdot \prod_{j=1}^k (x - x_j)$$

Nach Aitken-Neville ist das Interpolationspolynom zu den Punkten  $x_0, x_1, \dots, x_{n+1}$ :

$$\begin{aligned} p_{n+1}(x) &= \frac{1}{x_{n+1} - x_0} \cdot \begin{vmatrix} p_n(x) & x_0 - x \\ \tilde{p}_n(x) & x_{n-1} - x \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{x_{n+1} - x_0} \cdot (p_n(x)(x_{n+1} - x) - \tilde{p}_n(x)(x_0 - x)) \end{aligned}$$

und hat den Grad  $n+1$ .

Sein höchster Koeffizient ist  $\frac{-(x_n, \dots, x_0) + (x_{n+1}, \dots, x_1)}{(x_{n+1} - x_0)}$ .

Oder:

Das ist der Höchstkoeffizient des Newtonpolynoms durch  $x_0, \dots, x_{n+1}$ .

### 3.7 Interpolation mit Splines

Stützstellen  $x_0, x_1, \dots, x_n$  ( $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ )

Stützwerte  $y_0, y_1, \dots, y_n$

Die quadratische Interpolation, die mit Polynomen 2. Grades arbeitet, wird nicht weiter betrachtet. Wir beschränken uns auf die kubische Spline-Interpolation, die mit Polynomen 3. Grades arbeitet.

Suche eine abschnittsweise definierte Funktion  $S : [x_0, x_n] \rightarrow \mathbb{R}$ ,

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x) & \text{falls } x \in [x_0, x_1], \\ S_1(x) & \text{falls } x \in [x_1, x_2], \\ \vdots & \\ S_{n-1}(x) & \text{falls } x \in [x_{n-1}, x_n]. \end{cases}$$

Dabei sind  $S_i(x)$ , ( $i = 0, \dots, n-1$ ) Polynome 3. Grades.

Es soll gelten:

A:  $S$  verläuft durch die Stützstellen und Stützwerte:

$$S(x_i) = y_i \text{ für } i = 0, 1, \dots, n$$

B: Die linksseitige Steigung stimmt mit der rechtsseitigen überein:

$$\lim_{x \rightarrow x_i^+} S'(x_i) = \lim_{x \rightarrow x_i^-} S'(x_i) \text{ für } i = 0, 1, \dots, n-1$$

C: Die linksseitige Krümmung stimmt mit der rechtsseitigen überein:

$$\lim_{x \rightarrow x_i^+} S''(x_i) = \lim_{x \rightarrow x_i^-} S''(x_i) \text{ für } i = 0, 1, \dots, n-1$$

Wir wählen für  $S_i$  den Ansatz

$$S_i(x) = y_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \text{ für } i = 0, 1, \dots, n-1$$

Forderungen:<sup>2</sup>

$$S_i(x_{i+1}) = y_{i+1} \quad \text{für } i = 0, \dots, n-1 \quad (\text{A})$$

$$S'_i(x_{i+1}) = S'_{i+1}(x_{i+1}) \quad \text{für } i = 0, \dots, n-2 \quad (\text{B})$$

$$S''_i(x_{i+1}) = S''_{i+1}(x_{i+1}) \quad \text{für } i = 0, \dots, n-2 \quad (\text{C})$$

Aus (A), (B), (C) ergeben sich  $3n-2$  Forderungen für die  $3n$  zu bestimmenden Koeffizienten  $b_i$ ,  $c_i$  und  $d_i$  ( $i = 0, \dots, n-1$ ).

Fordert man nun zusätzlich

$$S''_0(x_0) = 0 \text{ und } S''_{n-1}(x_n) = 0 \quad (\text{D1})$$

---

<sup>2</sup>Genau genommen müssten hier die Grenzwerte betrachtet werden.

so ist die eindeutig bestimmte Lösung ein *natürlicher* kubischer Spline.  
 Fordert man stattdessen

$$y_0 = y_n \text{ und } S'(x_0) = S'_{n-1}(x_n) \quad (\text{D2})$$

so ist die eindeutig bestimmte Lösung ein *periodischer* kubischer Spline.

Für die Koeffizienten bedeuten diese Forderungen  
 mit  $x_{i+1} - x_i =: h_i$  ( $i=0, \dots, n-1$ ):<sup>3</sup>

$$y_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 = y_{i+1} \text{ für } (i = 0, \dots, n-1)$$

od.  $y_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_{i+1}$  (A)

$$b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1} \text{ für } (i = 0, \dots, n-2) \quad (\text{B})$$

$$2c_i + 6d_i h_i = 2c_{i+1} \text{ für } (i = 0, \dots, n-2) \quad (\text{C})$$

Zusatzforderung für natürliche Splines:

$$c_0 = 0, \quad 2c_{n-1} + 6d_{n-1}h_{n-1} = 0 \quad (\text{D1})$$

$$(d_{n-1} = \frac{c_{n+1}}{3h_{n-1}} \text{ setzt man } c_n \text{ künstlich auf } 0.)$$

Aus (C) erhält man  $d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}$  ( $i = 0, \dots, n-2$ )

Mit  $c_n := 0$  ist  $d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}$  (für  $i=0, \dots, n-1$ ). Dies ergibt  $n$  Gleichungen.  
 Setzt man das in (A) ein, lässt sich jede Gleichung von (A) nach  $b_i$  auflösen:

$$b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{2c_i + c_{i+1}}{3} h_i \quad (i = 0, \dots, n-1, c_0 = 0 \text{ berücksichtigt})$$

Eingesetzt in (B) erhält man

$$h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_i c_{i+1} = 3\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}\right) \text{ (für } i = 1, \dots, n-1)$$

Es kommen in dieser Gleichung nur  $c_{i-1}$ ,  $c_i$ ,  $c_{i+1}$  vor.

Die Gleichung kann als *Triagonalmatrix* angegeben werden:

$$\begin{pmatrix} \diamond & \diamond & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \diamond & \diamond & \diamond & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \diamond & \diamond & \diamond & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \diamond & \diamond & \diamond \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \diamond & \diamond \end{pmatrix} \cdot \vec{c} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

---

<sup>3</sup>Notiz: Ableitungen von  $S_i$  :  
 $S'_i(x) = b_i + 2c_i(x - x_i) + 3d_i(x - x_i)^2$   
 $S''_i(x) = 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1}$

## 4 Hermite-Interpolation

Bis jetzt war an jeder Stelle  $x_i$  genau ein Wert  $y_i = f(x_i)$  gegeben. Nun lassen wir aber mehrfachen Knoten zu, d.h., die Vielfachheit von  $x_i$  bedeutet  $H_n^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i)$ ,  $j = 0, \dots, k_i - 1$ , wobei  $H_n$  das Hermite-Interpolationspolynom ist und  $g^{(k)}(z)$  die  $k$ -te Ableitung der Funktion  $g$  an der Stelle  $z$  bezeichnet. Wenn  $m$  paarweise verschiedene Knoten mit Vielfachheiten  $k_1, \dots, k_m$  gegeben sind, dann gibt  $n = k_1 + k_2 + \dots + k_{m-1}$  die Ordnung von  $H_n$ . Sei  $a \leq x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n \leq b$ .

**Satz 4.1**  $H_n$  ist eindeutig.

**Beweis: 4.1**

Falls  $P, Q$  die verallgemeinerte Interpolationsaufgabe lösen, so ist  $P - Q$  ein Polynom vom Grad  $\leq n$  und wegen  $(P - Q)^{(j)}(x_i) = 0$ ,  $j = 0, 1, \dots, k_i - 1$  mit  $n + 1 = k_1 + \dots + k_m$  nullstellen (mit Vielfachheit).  
 $\Rightarrow P - Q \equiv 0$ .

**Folgerung 4.1**  $H_n$  existiert!

**Folgerung 4.2**  $x_i \neq x_j, i \neq j \Rightarrow$  Lagrange-Interpolation

**Folgerung 4.3**  $x_0 = x_1 = \dots = x_n \Rightarrow H_n(x) = \sum_{j=0}^n \frac{f^{(j)}(x_0)}{j!} (x - x_0)^j$   
Taylor-Polynom.

Die dividierten Differenzen (s. Newton-Interpolation!) für  $x_i = x_{i+1} = \dots = x_{i+j}$ ,  $j = 0, 1, \dots, k_i - 1$

$$[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+j}] = \frac{f^{(j)}(x)}{j!}.$$

Daher gilt  $H_n = \sum_{j=0}^n [x_0, x_1, \dots, x_j] \omega_j(x)$ , wobei  $\omega_j(x) = \prod_{i=0}^j (x - x_i)$ .  
Es gilt auch

$$f(x) - H_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega(x), \quad \min(x, x_0) \leq \xi \leq \max(x, x_n).$$

**Beispiel-Algorithmus (Hermite-Interpolation):**

Gegeben seien folgende Messwertpaare:

$$f(0) = -1 \quad f'(0) = -2 \quad f(1) = 0 \quad f'(1) = 10 \quad f''(1) = 40$$

a) Falls  $x_i = x_{i+k}$ :

$$[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{f_{r(i)+k}}{k!},$$

wobei  $r(i)$  die kleinste Zahl mit  $x_r = x_{r+1}$  ist.

b) Anderfalls:

$$[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] - [x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}.$$

Im Zähler des Bruchs steht "Tabellenwert von links unten"-"Tabellenwert von links oben".

c) Für die Basispolynome gilt:  $p_0 = 1$

$$p_j = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{j-1})$$

Zurück zu unseren Daten. Die Tabelle zur Berechnung der finiten differenzen sieht wie folgt aus:

$$\begin{array}{cccccccc}
 x_0 = 0 & [x_0] \stackrel{(1)}{=} -1 & & & & & & \\
 & & [x_0, x_1] \stackrel{(1)}{=} -2 & & & & & \\
 x_1 = 0 & [x_1] \stackrel{(1)}{=} -1 & & [x_0, x_1, x_2] \stackrel{(2)}{=} 3 & & & & \\
 & & [x_1, x_2] \stackrel{(2)}{=} 1 & & [x_0, \dots, x_3] \stackrel{(2)}{=} 6 & & & \\
 x_2 = 1 & [x_2] \stackrel{(1)}{=} 0 & & [x_1, x_2, x_3] \stackrel{(2)}{=} 9 & & [x_0, \dots, x_4] \stackrel{(2)}{=} 5 & & \\
 & & [x_2, x_3] \stackrel{(1)}{=} 10 & & [x_1, \dots, x_4] \stackrel{(2)}{=} 11 & & & \\
 x_3 = 1 & [x_3] \stackrel{(1)}{=} 0 & & [x_2, x_3, x_4] \stackrel{(1)}{=} 20 & & & & \\
 & & [x_3, x_4] \stackrel{(1)}{=} 10 & & & & & \\
 x_4 = 1 & [x_4] \stackrel{(1)}{=} 0 & & & & & & 
 \end{array}$$

Die Koeffizienten des Hermite-Polynoms stehen nun auf der oberen Diagonalen:

$$\begin{aligned}
 H_n(x) &= -1p_0 - 2p_1 + 3p_2 + 6p_3 + 5p_4 = \\
 &= -1 - 2x + 3x^2 + 6x^2(x - 1) + 5x^2(x - 1)^2
 \end{aligned}$$

#### 4.1 Trigonometrische Approximation

## 5 Gleichungen mit einer Veränderlichen (Nullstellenbestimmung)

Motivation: Lösung jeder algebraischen Gleichung kann als die Suche nach den Nullstellen einer Funktion interpretiert werden. Wie es oft in der Mathematik ist, viele Gleichungen lassen zwar die Existenz der Lösungen beweisen; die symbolische Berechnung ist aber nicht möglich.

Sogar die Polynomgleichungen der Form

$$\sum_{i=0}^n a_i x^i = 0,$$

die nach dem Hauptsatz der Algebra genau  $n$  komplexe Nullstellen besitzen, besitzen keine allgemeine Lösungsformeln mit geschachtelten Wurzel-  
ausdrücken (sog. Lösung in Radikalen), wie sie für Polynome vom Grad  $\leq 4$   
auch gefunden wurden. Alle Lösungsversuche für allgemeine Gleichungen  
von Grad 5 schlugen fehl; um nachweisen zu können, daß es unmöglich ist,  
benötigt man fortgeschrittene Techniken der Algebra, die wir nicht bespre-  
chen werden. Dieser Nachweis gelang nach Vorarbeiten von Paolo Ruffini  
(1765-1822) erst 1826 dem norwegischen Mathematiker Niels Henrik Abel  
(1802-1829). Eine allgemeine Theorie hat 1832 der französische Mathemati-  
ker Evariste Galois (1811-1832) gegeben.

Was soll man also machen, wenn die Lösungen einer solchen Gleichung ge-  
sucht wird? Man kann diese **numerisch approximieren!**

Gesucht sind Nullstellen einer Funktion  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ .

### 5.1 Bisektionsverfahren (Intervallhalbierungsverfahren)

ist  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  stetig und gilt  $f(a) \cdot f(b) < 0$ , so hat  $f$  eine Nullstelle in  
 $[a, b]$  (vgl. Beweis aus Analysis).



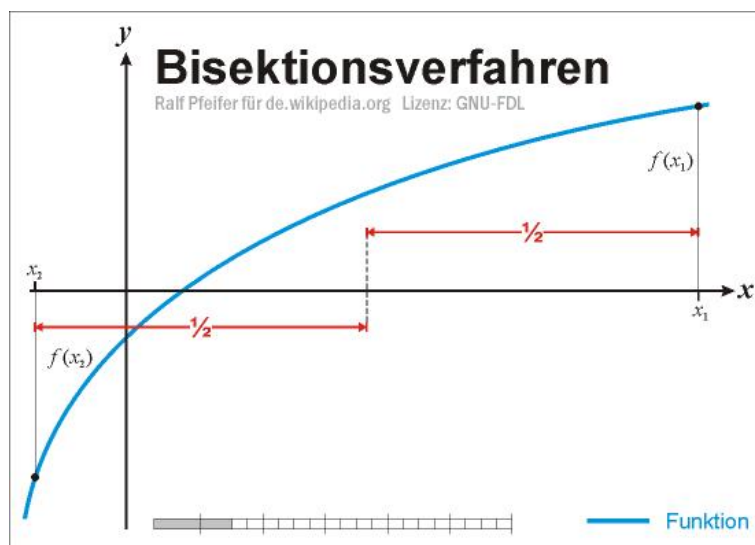


Abbildung 4: Intervallhalbierungsverfahren / Bisektion

## 5.2 Banach'sche Fixpunkt-Iterationsverfahren

...zum lösen der Gleichung  $x = \varphi(x) \Leftrightarrow \varphi(x) - x = 0$ , Lösung sei  $\omega$ . Konstruktion einer Iterationsfolge  $(x_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$  mit dem Startwert  $x_0$  und der Iterationsvorschrift  $x_{n+1} = \varphi(x_n)$

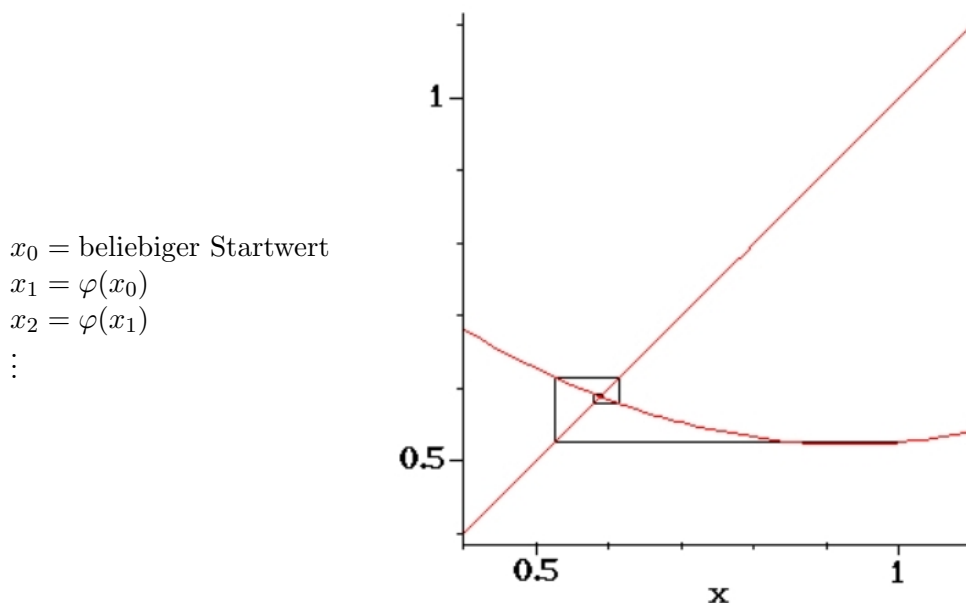


Abbildung 5: Iterationsverfahren

**Definition 5.1**

Eine Funktion  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  hat die Kontraktionseigenschaft mit der Kontraktionskonstanten  $0 < q < 1$ , wenn für alle  $x, y \in [a, b]$  gilt:

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq q \cdot |x - y|$$

Ist  $\varphi : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  differenzierbar, so gilt für  $x, y \in [a, b]$  nach dem Mittelwertsatz

$$\frac{\varphi(x) - \varphi(y)}{x - y} = \varphi'(c) \quad (c \text{ zwischen } x \text{ und } y)$$

Ist jetzt  $q := \sup_{x \in [a, b]} |\varphi'(x)| < 1$ , so ist

$$\left| \frac{\varphi(x) - \varphi(y)}{x - y} \right| = |\varphi'(c)| < q \Leftrightarrow |\varphi(x) - \varphi(y)| \leq q \cdot |x - y|$$

Also hat mit  $q < 1$  die Funktion  $\varphi$  die Kontraktionseigenschaft.

**Satz 5.1** Sei  $\varphi : [a, b] \rightarrow [a, b]$  eine kontraktive Funktion mit der Kontraktionskonstanten  $q < 1$ . Dann konvergiert die rekursiv definierte Folge  $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$  mit  $x_{n+1} = \varphi(x_n) \forall n \in \mathbb{N}$  bei beliebigen Startwert  $x_0 \in [a, b]$  gegen die einzige Lösung  $\omega$  der Gleichung  $x = \varphi(x)$ .

**Beweis: 5.1**

Sei  $x_0 \in I$ . Dann ist  $x_n \in I \forall n \in \mathbb{N}$ .

$$\begin{aligned} |x_{n+1} - x_n| &= |\varphi(x_n) - \varphi(x_{n-1})| \\ &\leq q \cdot |x_n - x_{n-1}| \\ &\stackrel{4}{\leq} q^n \cdot |x_1 - x_0| \quad (n > m) \\ |x_n - x_m| &= |x_n - x_{n-1} + x_{n-1} - x_{n-2} + x_{n-2} - \dots + x_{m+1} - x_m| \\ &\leq \sum_{k=m+1}^n |x_k - x_{k-1}| \leq \left( \sum_{k=m+1}^n q^{k-1} \right) \cdot |x_1 - x_0| \\ &\leq \left( \sum_{k=m+1}^{\infty} q^{k-1} \right) \cdot |x_1 - x_0| \\ &\stackrel{5}{=} \frac{q^m}{1 - q} \cdot |x_1 - x_0| \stackrel{6}{<} \epsilon \end{aligned}$$

$(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$  ist also Cauchy-Folge und deshalb konvergent; Grenzwert  $\omega$ . Aus der Kontraktionseigenschaft von  $\varphi$  folgt die Stetigkeit, denn

$$|\varphi(x+h) - \varphi(x)| \leq q \cdot |h|, \text{ also } \lim_{h \rightarrow 0} \varphi(x+h) = \varphi(x).$$

$$\text{Dann ist } \omega = \lim_{h \rightarrow \infty} x_{n+1} = \lim_{h \rightarrow \infty} \varphi(x_n) \underbrace{=} \varphi(\omega).$$

Stetigkeit von  $\varphi$

$\omega$  heißt Fixpunkt der Iteration.  $\omega$  ist einziger Fixpunkt, denn wäre  $\omega_2 \neq \omega$  ein weiterer Fixpunkt, so würde gelten

$$|\omega - \omega_2| = |\varphi(\omega) - \varphi(\omega_2)| \leq q \cdot |\omega - \omega_2| \leq |\omega - \omega_2|$$

Also existiert nur genau ein Fixpunkt.

Aus der Abschätzung folgt

$$|\omega - x_n| \leq \frac{q^m}{1-q} \cdot |x_1 - x_0| \text{ (A-priori-Abschätzung)}$$

$$q^m < 10^{-5} \rightarrow \text{Nst. auf 5 Nachkommastellen berechnet.}$$

$$|\omega - x_n| \leq \frac{q}{1-q} \cdot |x_n - x_{n-1}| \text{ (A-posteriori-Abschätzung)}$$

---

<sup>4</sup>Induktion

<sup>5</sup>vgl.:  $\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1-q} = 1 + q + q^2 + \dots$

<sup>6</sup>falls  $m$  hinreichend groß

5 GLEICHUNGEN MIT EINER VERÄNDERLICHEN (NULLSTELLENBESTIMMUNG)

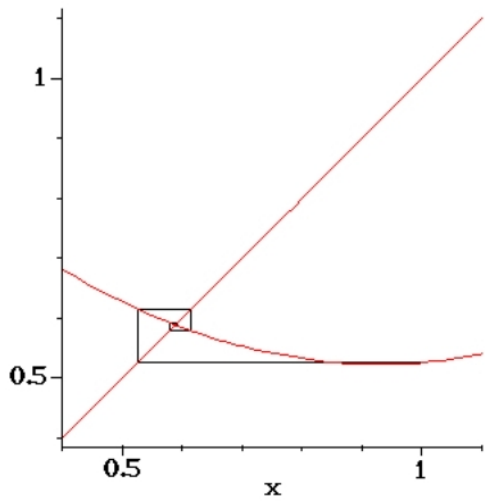


Abbildung 6: pos. Beispiel

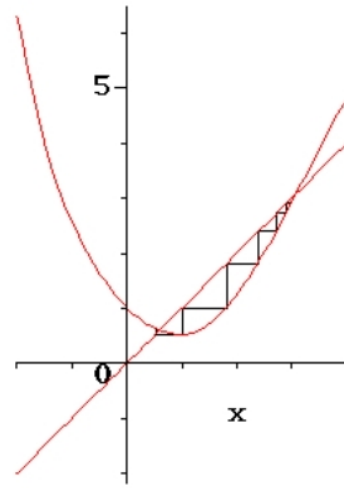


Abbildung 7: pos. Beispiel

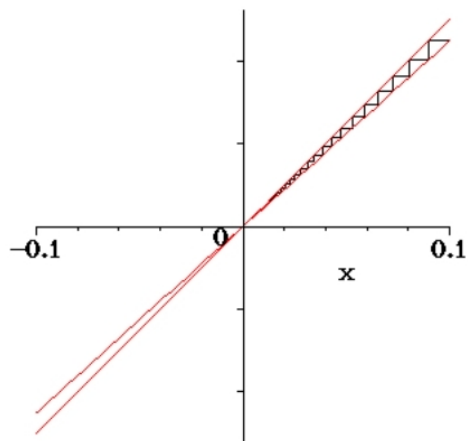


Abbildung 8: neg. Beispiel

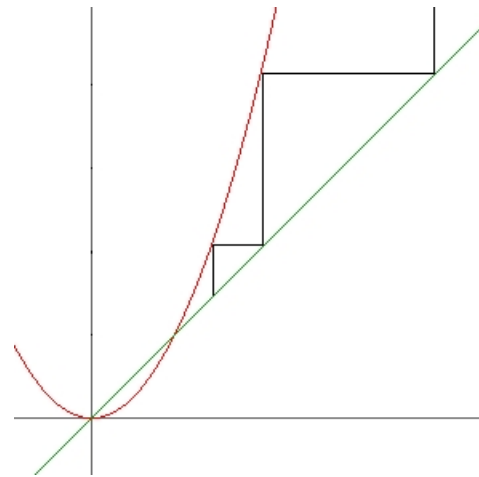


Abbildung 9: neg. Beispiel

**Satz 5.2** Ist  $g : I \rightarrow I$  gegebene Funktion und existiert  $q \in [0, 1]$  mit  $\forall x_1, x_2 \in I$  ist  $|g(x_1) - g(x_2)| \leq q \cdot |x_1 - x_2|$ , so heißt  $g$  **Kontraktion** (kontraktive Abbildung) mit der Kontraktionskonstanten  $q$ .

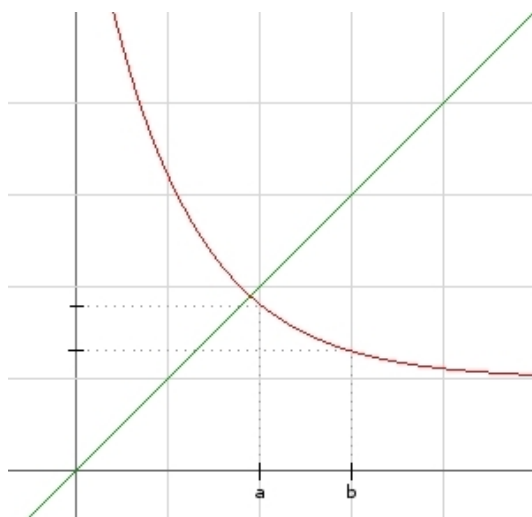
**Beweis: 5.2**

ohne Beweis.

Ist  $g$  differenzierbar und ist

$$\max_{x \in I} |g'(x)| =: q < 1 \quad ^7$$

so ist  $q$  Kontraktionskonstante.



Bei streng monotonen Funktionen reicht die Betrachtung der Intervallgrenzen, um zu zeigen, dass die Funktion in sich abbildet.

Abbildung 10: Streng monotone Funktion

<sup>7</sup>Je kleiner  $q$ , desto schneller konvergiert die Folge ("flache" Funktion)

### 5.3 Newton-Raphson-Verfahren zur Nullstellenbestimmung

Motivation: Die grundlegende Idee dieses Verfahrens ist, die Funktion in einem Ausgangspunkt zu linearisieren, d.h. ihre Tangente zu bestimmen und die Nullstelle der Tangente als verbesserte Näherung der Nullstelle der Funktion zu verwenden. Die dadurch erhaltene Näherung kann wieder als Ausgangspunkt für einen weiteren Verbesserungsschritt dienen. Diese Iteration wird so oft wiederholt, bis die Änderung in der Näherungslösung eine festgesetzte Schranke unterschreitet. Das unendlich oft fortgesetzte Iterations-Verfahren konvergiert im günstigsten Fall mit quadratischer Konvergenzordnung, die Zahl der korrekten Dezimalstellen verdoppelt sich dann in jedem Schritt.

Sei  $f : I \rightarrow \mathbb{R}$  eine differenzierbare Funktion.

Tangente in  $(x_n, f(x_n))$  ist  $y - f(x_n) = f'(x_n) \cdot (x - x_n)$

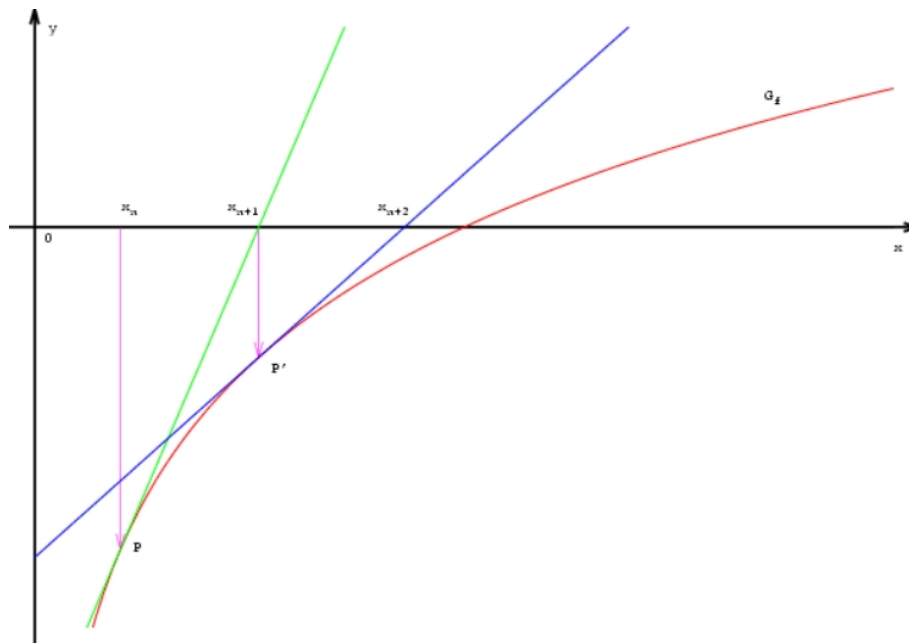


Abbildung 11: funktionierendes Newton-Verfahren

Schnitt mit x-Achse ( $y = 0$ ) liefert die Iterationsvorschrift:

$x_0$ : Startwert

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Negativ-Beispiele:

- a) Verfahren entfernt sich von der Nullstelle, anstatt sich ihr zu nähern

Im Beispiel wird der (ungeeignete) Startwert  $x_0$  rechts neben dem lokalen Extremum gewählt.

Die Iteration bewegt sich daher immer weiter von der Nullstelle weg.

Die sich ergebenden Werte nähern sich immer mehr der 0 an. Da die Funktion für  $x > 0$  keine Nullstelle besitzt, wird vom Verfahren nie eine gefunden.

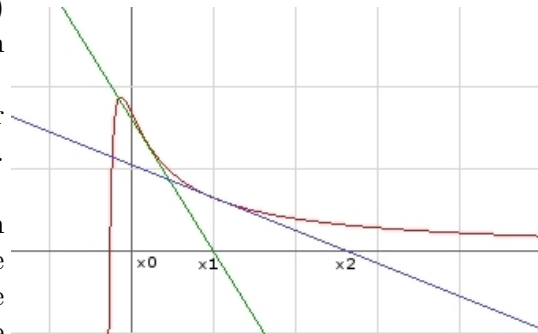


Abbildung 12: Verfahren entfernt sich

- b) Endlosschleife im Newton-Verfahren

Wir betrachten die Funktion  $f(x) = x^3 - 2x + 2$  (rot) und wählen für das Newton-Verfahren den Startwert  $x_0 = 0$ .

1. Iterationsschritt (grün):  
 $x_1 = 1$ .

2. Iterationsschritt (blau):  
 $x_2 = 0$ !

Nach 2 Iterationen sind wir wieder am Anfang, denn  $x_2$  hat den gleichen Wert wie  $x_0$ . Das Verfahren endet also nie (Endlosschleife).

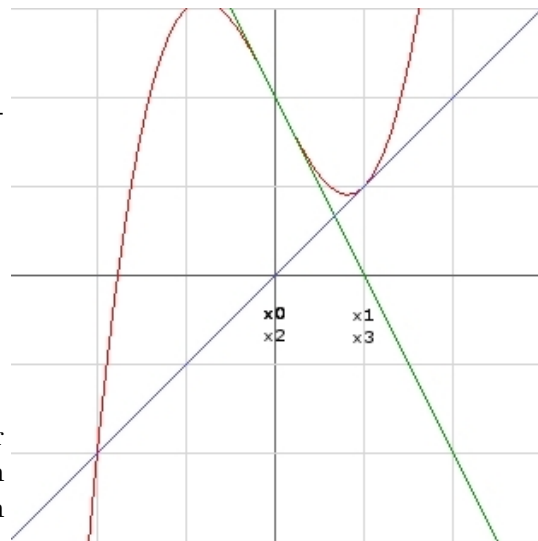


Abbildung 13: Endlosschleife: 0,1,0,1,...

## 5 GLEICHUNGEN MIT EINER VERÄNDERLICHEN (NULLSTELLENBESTIMMUNG)

Als Kontraktion interpretiert (wann genau funktioniert das Verfahren nicht?):

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= \varphi(x_n) \text{ mit} \\ \varphi(x) &= x - \frac{f(x)}{f'(x)} \\ |\varphi'(x)| &= \left| 1 - \frac{f'(x) - f(x) \cdot f''(x)}{f'^2(x)} \right| \\ &= \left| \frac{f(x) \cdot f''(x)}{f'^2(x)} \right| \overset{8}{<} 1\end{aligned}$$

Ist  $x_0$  nahe einer Nullstelle, so ist dort

$$\left| \frac{f(x) \cdot f''(x)}{f'^2(x)} \right| < 1$$

sofern  $f'^2(x) \geq k > 0$

Weiterführende Links zum Thema:

[Newton-Verfahren bei Wikipedia](#)

---

<sup>8</sup>Kontraktionskonstante muß  $< 1$  sein, damit Verfahren gegen die Nullstelle konvergiert.



## 6 Numerische Quadratur (numerische Integration)

Motivation: Aus der Geometrie wissen wir, wie der Flächeninhalt von geradlinig begrenzten Flächen zu berechnen ist. Beliebige krummlinig begrenzte Flächen berechnen wir mit Hilfe von Integralen. Diese lassen sich jedoch nur lösen, wenn die Stammfunktion durch die uns geläufigen elementaren Funktionen analytisch bestimmt werden kann. Wie ermittelt man aber Flächeninhalte (näherungsweise), wenn die Stammfunktion sich nicht durch die geläufigen Funktionen analytisch bestimmen lässt (z.B. bei  $\int_a^b \frac{\sin(x)}{x} dx$ )? Es soll  $\int_a^b f(x) dx$  für eine stetige Funktion  $f$  näherungsweise berechnet werden. Dazu gibt es mehrere Möglichkeiten:

### 6.1 Ober- bzw. Untersummen

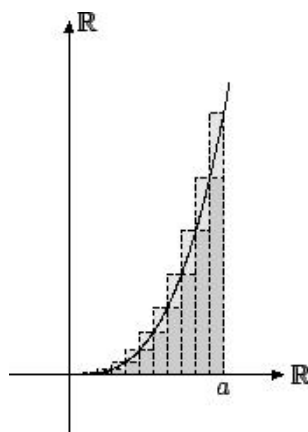


Abbildung 14: Ober- und Untersummen

Zerlege  $[a, b]$  gemäß  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$

$$\text{Obersumme } O_s := \sum_{i=1}^n M_i(x_i - x_{i-1}) \text{ wobei } M_i = \max_{x \in [x_{i-1}, x_i]} f(x)$$

$$\text{Untersumme } U_s := \sum_{i=1}^n m_i(x_i - x_{i-1}) \text{ wobei } m_i = \min_{x \in [x_{i-1}, x_i]} f(x)$$

## 6.2 Mittelpunktsregel

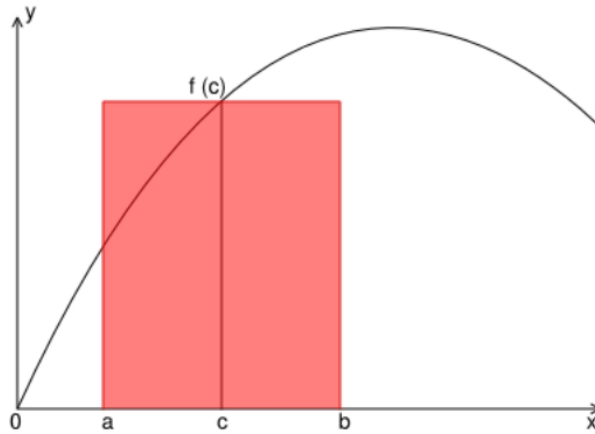


Abbildung 15: Mittelpunktsregel

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \cdot f\left(a + \frac{h}{2}\right)$$

Lineares Interpolationspolynom durch  $(a, f(a))$ ,  $(a + h, f(a + h))$ :

$$y - f(a) = \frac{f(a + h) - f(a)}{h} \cdot (x - a)$$

Integration dieses linearen Polynoms zwischen  $a$  und  $a + h$  liefert

$$\begin{aligned} & \int_a^{a+h} \left( f(a) + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x - a) \right) dx \\ &= \int_a^{a+h} \left( f(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h}a + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}x \right) dx \\ &= \left[ \left( f(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h}a \right)x + \frac{1}{2} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}x^2 \right]_{x=a}^{x=a+h} \\ &= \left( f(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h}a \right)h + \frac{1}{2h} (f(a+h) - f(a)) \left( (a+h)^2 - a^2 \right) \\ &= f(a)h - (f(a+h) - f(a))a + \frac{1}{2h} (f(a+h) - f(a)) (2ah + h^2) \\ &= f(a)h - (f(a+h) - f(a))a + (f(a+h) - f(a))a + \frac{h}{2} (f(a+h) - f(a)) \\ &= \frac{h}{2} f(a+h) + \frac{h}{2} f(a) \\ &= \frac{h}{2} (f(a+h) + f(a)) \end{aligned}$$

### 6.3 Zusammengesetzte Sehnentrapezregel

Seit  $[a, b]$  in  $n$  Teilintervalle zerlegt.  $a < a + h < \dots < a + nh = b$  ( $h = \frac{b-a}{n}$ )

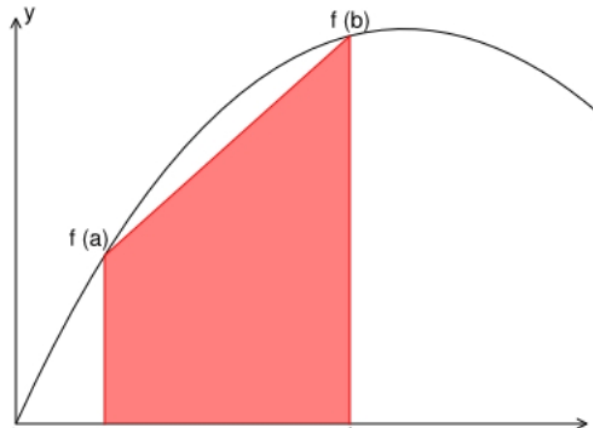


Abbildung 16: Sehnentrapezregel

$$\int_{a+(n-1)h}^{a+nh} f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f(a+(n-1)h) + f(a+nh))$$

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^{a+nh} f(x) dx$$

$$\approx h \left( \frac{f(a)}{2} + f(a+h) \right) + f(a+2h) + \dots + f(a+(n-1)h) + \frac{f(b)}{2}$$

Bezeichnet man die Funktionswerte von  $f$  an den Stellen  $a+ih$  ( $i = 0, \dots, n$ ) mit  $y_0, \dots, y_n$ , so lautet die Formel

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \left( \frac{y_0}{2} + y_1 + \dots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2} \right)$$

Beispiel:

$$\int_1^2 \left( \frac{1}{2}x^2 - 2x \right) dx = \left. \frac{1}{6}x^3 - x^2 \right|_1^2$$

$$= \frac{8}{6} - 4 - \frac{1}{6} + 1 = \frac{7}{6} - 3 = -\frac{11}{6} = -\frac{88}{48}$$

zum Vergleich: gleiches Beispiel, Sehnentrapezregel mit 2 Teilintervallen.  $1, \frac{3}{2}, 2$ , Funktionswerte sind  $-\frac{3}{2}, -\frac{15}{8}, -2$ ,  $h = \frac{1}{2}$

$$\int_1^2 \left( \frac{1}{2}x^2 - 2x \right) dx \approx \frac{1}{2} \left( -\frac{3}{2} - \frac{15}{8} - 2 \right) = -\frac{29}{16} = -\frac{87}{48}$$

Wie groß ist der Fehler? Man sieht, dass die Differenz lediglich  $\frac{1}{48}$  beträgt.

### 6.4 Simpson-Regel oder Keplersche Fassregel

$f : [a, a + 2h] \mapsto \mathbb{R}$  stetig soll näherungsweise berechnet werden.

Durch die Stützstellen  $x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = a + 2h$  mit den Stützwerten

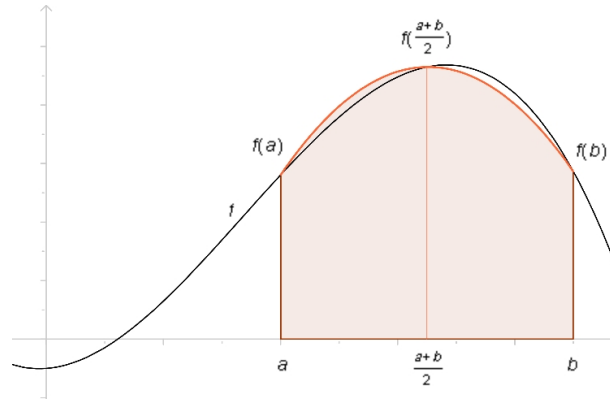


Abbildung 17: Simpson-Regel od. Keplersche Fassregel

$f(a) = y_0, f(a + h) = y_1, f(a + 2h) = y_2$  wird das Interpolationspolynom vom Maximalgrad 2 gelegt und integriert. Man erhält

$$\int_a^{a+2h} f(x) dx \approx \int_a^{a+2h} IP dx = \frac{h}{3} \left( f(a) + 4f(a+h) + f(a+2h) \right)$$

Wir berechnen unser Beispiel nun mit der Keplerschen Fassregel:

$$\begin{aligned} \int_1^2 \left( \frac{1}{2}x^2 - 2x \right) dx &\approx \frac{1}{6} \left( f(1) + 4 \cdot f\left(\frac{3}{2}\right) + f(2) \right) \\ &= \frac{1}{6} \left( -\frac{3}{2} + 4 \cdot \left( -\frac{15}{8} \right) - 2 \right) = \frac{1}{6} \left( \frac{-3 - 15 - 4}{2} \right) = -\frac{22}{12} = -\frac{88}{48} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$  Mit der Keplerschen Fassregel erhalten wir den exakten Wert.<sup>9</sup>

---

<sup>9</sup>Achtung: Die Keplersche Fassregel liefert immer nur dann einen exakten Wert, wenn das zu integrierende Polynom vom Höchstgrad 3 ist.

## 6.5 Beispiele

Quadraturformeln:

$$\text{Trapezregel } \int_a^{a+h} f(x) dx \approx \frac{h}{2}(y_0 + y_1)$$

$$\text{Keplersche Fassregel } \int_a^{a+2h} f(x) dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)$$

$$\text{Newtonsche } \frac{3}{8}\text{-Regel } \int_a^{a+3h} f(x) dx \approx \frac{3}{8}h(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

$$\text{Milne-Regel } \int_a^{a+4h} f(x) dx \approx \frac{2}{45}h(7y_0 + 32y_1 + 12y_2 + 32y_3 + 7y_4)$$

Fehler bei Sehnentrapezregel

Sekante hat die Gestalt  $p(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h}(x - a)$ .

$$\int_a^{a+h} p(x) dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1)$$

Fehler bei Polynominterpolation ist  $x := a, a + h =: x_1$

$$|p(x) - f(x)| = \frac{f^{n-1}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

Der Fehler bei Integration ist bei Verwendung der Sehnentrapezregel

$$\begin{aligned} & \left| \int_{x_0}^{x_1} p(x) dx - \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \right| = \left| \int_{x_0}^{x_1} (p(x) - f(x)) dx \right| \\ &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{f''(\xi)}{2!} (x - x_0)(x - x_1) dx \\ &= \frac{f''(\xi)}{2!} \cdot \int_{x_0}^{x_1} \underbrace{(x - x_0)}_{f'} \underbrace{(x - x_1)}_g dx \end{aligned}$$

Nebenrechnung: Lösen des Integrals

$$\begin{aligned} & \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) dx \\ &= (x - x_0) \frac{1}{2} (x - x_1)^2 \Big|_{x_0}^{x_1} - \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{2} (x - x_0)^2 dx \\ &= \frac{1}{6} (x - x_0)^3 \Big|_{x_0}^{x_1} \\ &= \frac{1}{6} (x_1 - x_0)^3 \end{aligned}$$

Diese Lösung des Integrals eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned} F_{ST} &= \frac{f''(\xi)}{2!} \cdot \frac{1}{6} (x_1 - x_0)^3 \\ &= \frac{f''(\xi)}{12} h^3 \end{aligned}$$

Mit gleicher Vorgehensweise erhält man für die Keplersche Fassregel die Fehlerformel

$$F_{KF} = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi).$$

bei Newtons  $\frac{3}{8}$ -Regel erhält man

$$F_{N\frac{3}{8}} = -\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$$

### 6.6 Tabelle zu Quadraturformeln

Die Quadraturformel hat die Gestalt  $\frac{h}{s} \sum_{i=0}^n w_i y_i$ .

| Name                 | n | Gewichte ( $\omega_i$ ) | s              | Ordnung <sup>10</sup> | Fehler                           |
|----------------------|---|-------------------------|----------------|-----------------------|----------------------------------|
| Trapezregel          | 1 | 1 1                     | 2              | 1                     | $\frac{f''(\xi)}{12} h^3$        |
| Fassregel            | 2 | 1 4 1                   | 3              | 3                     | $-\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi)$ |
| Newton $\frac{3}{8}$ | 3 | 1 3 3 1                 | $\frac{8}{3}$  | 3                     | $-\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$ |
| Milne                | 4 | 7 32 12 32 7            | $\frac{45}{2}$ | 5                     | ...                              |

Beispiel  $f(x) = 4x^3 - 2x^2 + x - 1$ :

$$\begin{aligned}
 \int_{x=0}^4 f(x) dx &= \frac{2}{3} (f(0) + 4f(2) + f(4)) \\
 &= \frac{2}{3} (-1 + 4 \cdot 25 + 227) = \frac{2 \cdot 326}{3} \\
 &= \frac{652}{3}
 \end{aligned}$$

---

<sup>10</sup>Die Ordnung einer Quadraturformel ist der grösste Polynomgrad für den die Formel exakte Werte liefert.

## 7 Lineare Regression (Methode der kleinsten Quadrate)

Motivation: Man versucht für eine gegebene Punktmenge (z.B. durch konkrete Messungen bestimmt) den Mittelwert in Form einer Geraden zu approximieren. Diese Trendgerade oder Regressionsgerade stellt dann eine einfache Näherungsfunktion dar.

Intuitiv würde man, um die Trendgerade zu ermitteln, folgenden Ansatz verwenden: Bestimme die Gerade, die von allen Punkten den minimalen Abstand besitzt. Die entstehende Extremwertaufgabe besteht aus einer zusammengesetzten Betragsfunktion. Da es bei Betragsfunktionen bekanntlich Probleme mit der Differenzierbarkeit an den Verheftungsstellen gibt, wird dieses Verfahren nicht angewendet.

Man vereinfacht stattdessen die Aufgabenstellung, indem man den Abstand der Quadrate minimiert. Dadurch kann man mit den Mitteln der Differentialrechnung das Extrema (Minimum) bestimmen (→ Methode der kleinsten Quadrate).

$x_i, y_i$  seien Ausprägungen des Merkmals X bzw. Y ( $i = 1, \dots, n$ ), z.B. (X, Y) Geschwisterpaare Brüder/Schwestern,  $(x_i, y_i)$  Körpergrößen von  $n$  Geschwistern. Suche eine Trendgerade (Regressionsgerade) der Form  $y =$

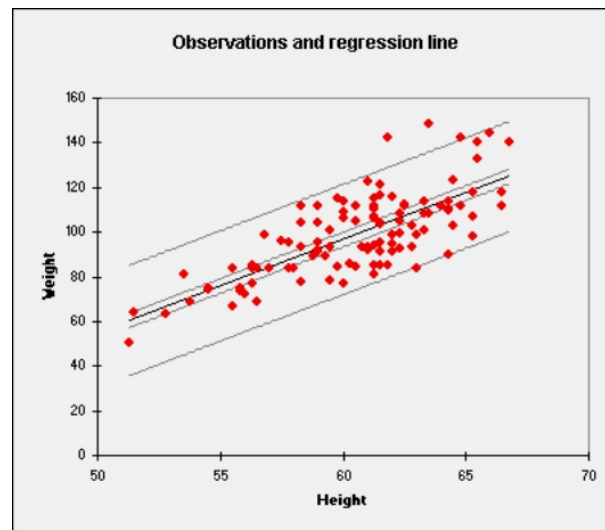


Abbildung 18: Beispiel lineare Regression



## 7 LINEARE REGRESSION (METHODE DER KLEINSTEN QUADRATE)

$a + bx$  mit der Eigenschaft

$$F(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 \rightarrow \min.$$

(Der Abstand aller Punkte zur Geraden muß minimal werden.)

Weiter sei

$$F(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 \rightarrow \min.$$

$$\frac{\partial F}{\partial a}(a, b) = \sum_{i=1}^n 2(y_i - a - bx_i)^1 \cdot (-1) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial b}(a, b) = \sum_{i=1}^n 2(y_i - a - bx_i)^1 \cdot x_i \stackrel{!}{=} 0$$

$$\left| \begin{array}{l} n \cdot a + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a \cdot \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{array} \right| \text{Normalgleichungen}$$

Regressionsgerade  $P_k = (x_k, y_k)$ ,  $k = 1, \dots, n$

Suche Gerade  $y = ax + b$  mit

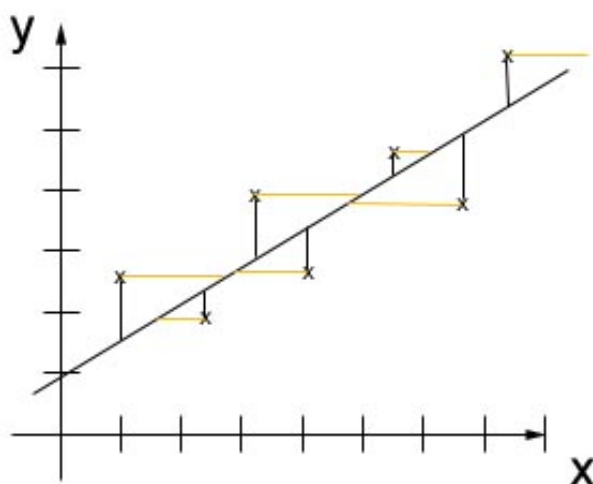


Abbildung 19: Beispiel Regressionsgerade

$$F(a, b) = \sum_{k=1}^n (ax_k + b - y_k)^2 \rightarrow \min$$

$$F_a(a, b) = 0 \quad \sum_{k=1}^n 2(ax_k + b - y_k)x_k = 0$$

$$F_b(a, b) = 0 \quad \sum_{k=1}^n 2(ax_k + b - y_k) = 0$$

$$\left. \begin{aligned} a \sum x_k^2 + b \sum x_k &= \sum x_k y_k \\ a \sum x_k + n \cdot b &= \sum y_k \end{aligned} \right\} \text{Normalengleichungen}$$

Lösen nach Cramer-Regel:

$$\det = n \sum x_k^2 - \left( \sum x_k \right)^2$$

$$a = \frac{1}{\det} \left( n \cdot \sum x_k y_k - \left( \sum x_k \right) \left( \sum y_k \right) \right)$$

$$b = \frac{1}{\det} \left( n \cdot \sum x_k^2 - \left( \sum y_k \right) \left( \sum x_k \right) \right)$$

Abkürzungen:

$$x = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k, \quad y = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k \quad \text{Mittelwerte}$$

$$S_x^2 := \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (x_k - x)^2 \quad \text{Standardabweichung der } x_k$$

$$S_{xy} := \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (x_k - x)(y_k - y) \quad \text{Kovarianz der Meßpunkte}$$

Dann ist

$$\begin{aligned}
 S_x^2 \cdot (n-1) &= \sum (x_k^2 - 2x_kx + x^2) = \sum x_k^2 - 2x \sum x_k + n \cdot x^2 \\
 &= \sum x_k^2 - 2nx^2 + nx^2 \\
 &= \sum x_k^2 - nx^2 \\
 &= \sum x_k^2 - \frac{1}{n} \left( \sum x_k \right)^2 \\
 S_x^2 &= \frac{1}{n-1} \left( \sum x_k^2 - \frac{1}{n} \left( \sum x_k \right)^2 \right)
 \end{aligned}$$

In ähnlicher Weise

$$S_{xy} = \frac{1}{n-1} \left( \sum x_k y_k - \frac{1}{n} \left( \sum x_k \right) \left( \sum y_k \right) \right)$$

$$\begin{aligned}
 a &= \frac{1}{n} \sum x_k y_k - \left( \frac{\sum x_k}{n} \right) \left( \frac{\sum y_k}{n} \right) = \frac{\sum x_k y_k}{n} - \frac{\left( \sum x_k \right) \left( \sum y_k \right)}{n^2} \\
 &= \frac{n(n-1)S_{xy}}{n(n-1)S_x^2} \\
 &= \frac{S_{xy}}{S_x^2} \\
 b &= \frac{1}{n} \left( \sum y_k - a \cdot \sum x_k \right) = \bar{y} - a \cdot \bar{x}
 \end{aligned}$$

Regressionsgerade:  $y = ax + b = ax + \bar{y} - a \cdot \bar{x}$

$y - \bar{y} = a(x - \bar{x})$

Beispiel: Hooksches Gesetz

$y = ax + b$

7 LINEARE REGRESSION (METHODE DER KLEINSTEN QUADRATE)

|          | $x_k$ | $y_k$ | $x_k^2$ | $x_k \cdot y_k$ | $x - x_k$ |
|----------|-------|-------|---------|-----------------|-----------|
|          | 5     | 34    | 25      | 170             |           |
|          | 10    | 52    | 100     | 520             |           |
|          | 15    | 66    | 225     | 990             |           |
|          | 20    | 79    | 400     | 1580            |           |
|          | 25    | 97    | 625     | 2425            |           |
|          | 30    | 110   | 900     | 3300            |           |
| $\Sigma$ | 105   | 438   | 2275    | 8985            |           |

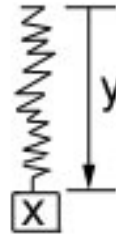


Abbildung 20: Hooksches Gesetz

$$x = \frac{105}{6} = 17,5, y = \frac{438}{6} = 73$$

$$S_x^2 = \frac{1}{5}(2275 - \frac{1}{6} \cdot 105^2) = 87,5$$

$$S_{xy} = \frac{1}{5}(8985 - 6 \cdot 17,5 \cdot 73) = 264$$

$$a = \frac{S_{xy}}{S_x^2} = 3,0171$$

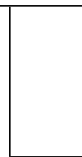
Regressionsgerade:  $y - 73 = 3,0171(x - 17,5)$

$$H(a, b) = \begin{vmatrix} F_{aa} & F_{ab} \\ F_{ab} & F_{bb} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 \sum x_k^2 & 2 \sum x_k \\ 2 \sum x_k & 2n \end{vmatrix} = 4 \left( n \sum x_k^2 - (\sum x_k)^2 \right) > 0$$

$$|a \cdot b|^2 \leq |a|^2 |b|^2$$

$$a = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

**Beweis: 7.1**



$$\left( \sum x_k \right)^2 \leq \sum x_k^2 \cdot n$$

Einschub: zu Funktionen in 2 Veränderlichen:

Tangentialebene in  $(x_0, y_0)$

$$\begin{pmatrix} -f_x \\ -f_y \\ 1 \end{pmatrix} \left[ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix} \right] = 0$$

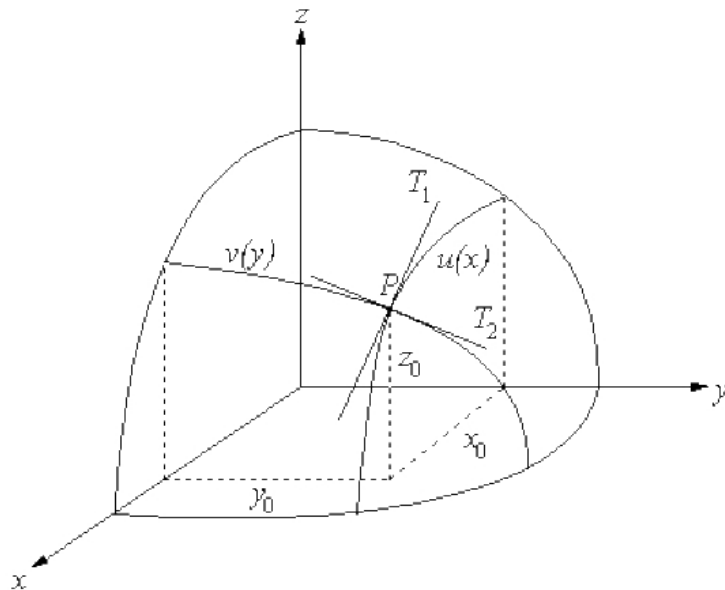


Abbildung 21: von Tangentenvektoren aufgespannte Tangentialebene

$z - z_0 = f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0)$  vgl. Taylor:  
 $f(x, y) = f(x_0, y_0) + f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0) + \frac{1}{2!}(\dots)$

$f : \mathbb{G} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\mathbb{G} \in \mathbb{R}^2$  Gebiet,  $f$  zweimal differenzierbar.  $(x_0, y_0) \in \mathbb{G}$

$$\begin{aligned}
 f(x_0 + h, y_0 + k) &= f(x_0, y_0) + hf_x(x_0, y_0) + kf_y(x_0, y_0) \\
 &+ \frac{1}{2!} \left( \underbrace{f_{xx}(x_0, y_0)h^2 + 2hkf_{xy}(x_0, y_0) + k^2f_{yy}(x_0, y_0)}_{(QF)} \right) \\
 &+ \varepsilon \rho^2
 \end{aligned}$$

Ist  $f_x(x_0, y_0) = f_y(x_0, y_0) = 0$ , so liegt in  $(x_0, y_0)$   
 ein lokales Maximum vor, wenn  $(QF) < 0$ ,  
 ein lokales Minimum vor, wenn  $(QF) > 0$ ,  
 ein Sattelpunkt vor, wenn  $(QF)$  unterschiedliche Vorzeichen in  $[x_0 - h, x_0 + h] \times [y_0 - k, y_0 + k]$ .  
 ( für alle  $(h, k) \neq (0, 0)$ .)

Setzt man

$$\begin{aligned} f_{xx}(x_0, y_0) &=: a \\ f_{xy}(x_0, y_0) &=: b \\ f_{yy}(x_0, y_0) &=: c \end{aligned}$$

in (QF) ein, so erhält man  $ah^2 + 2bhk + ck^2 =: Q(h, k)$ .

(QF) heißt quadratische Form und lässt sich auch wie folgt darstellen:

$$Q(h, k) = (h, k) \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}$$

$$\text{wobei } (h, k) \cdot \begin{pmatrix} ah + bk \\ bh + ck \end{pmatrix} = ah^2 + 2bhk + ck^2$$

Sei  $a \neq 0$ .

$$\begin{aligned} Q(h, k) &= a \left( h^2 + \frac{2b}{a}hk + \frac{c}{a}k^2 \right) \\ &= a \left( h^2 + 2\frac{b}{a}hk + \frac{b^2}{a^2}k^2 + \left( \frac{c}{a} - \frac{b^2}{a^2} \right) k^2 \right) \\ &= a \left( \left( h + \frac{b}{a}k \right)^2 + \frac{ac - b^2}{a^2}k^2 \right) \end{aligned}$$

Ist  $a > 0$  und  $\underbrace{ac - b^2}_{\text{det der Hes. Normalform}} > 0$ , so ist  $Q(h, k) > 0 \quad \forall (h, k) \neq (0, 0)$ .

$Q$  heißt positiv definit.

Ist  $a < 0$  und  $ac - b^2 > 0$ , so ist  $Q(h, k) < 0 \quad \forall (h, k) \neq (0, 0)$ .

$Q$  heißt negativ definit.

Ist  $ac - b^2 > 0$ , so ist

$$\begin{aligned} Q(h, k) &= a \left( h + \frac{b}{a}k + \frac{\sqrt{b^2 - ac}}{a}k \right) \left( h + \frac{b}{a}k - \frac{\sqrt{b^2 - ac}}{a}k \right) \\ &= a \left( h + \left( \frac{b}{a} + \frac{\sqrt{b^2 - ac}}{a} \right) k \right) \left( h + \left( \frac{b}{a} - \frac{\sqrt{b^2 - ac}}{a} \right) k \right) \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} Q(h, k) &> 0 \text{ falls } \left( h - \frac{b}{a}k \right)^2 > \frac{b^2 - ac}{a^2}k^2 \\ Q(h, k) &< 0 \text{ falls } \left( h - \frac{b}{a}k \right)^2 < \frac{b^2 - ac}{a^2}k^2 \end{aligned} \right\} Q(h, k) \text{ heißt in diesem Fall indefinit.}$$

Ist  $a = 0$ , kann eine entsprechende Überlegung mit  $b \neq 0$  gemacht werden.

Ist  $a = b = 0$ , so ist  $Q(h, k)$  indefinit.

Beispiel:  $Q(h, k) = ah^2 + 2bhk + ck^2$

$$a = 0, b > 0, c = 0. \quad (3)$$

$Q(h, k) = 2bhk > 0$  falls  $h, k$  gleiche Vorzeichen haben.

$Q(h, k) = 2bhk < 0$  falls  $h, k$  ungleiche Vorzeichen haben.

$Q(h, k) = 0$  falls  $h + 4k = \sqrt{15}k$ .

$$a = 1, b = 0, c = 1. \quad (4)$$

$Q(h, k) = h^2 + k^2 > 0$

$Q(h, k) = 0$  falls  $h + (4 - \sqrt{15})k = 0$ .

$$a = 1, b = 4, c = 1. \quad (5)$$

$Q(h, k) = h^2 + 8hk + k^2 = h^2 + 8hk + 16k^2 + k^2 - 16k^2$

$= (h + 4k)^2 - 15k^2 > 0$  falls  $(h + 4k)^2 > 15k^2$

( $Q$  indefinit, da  $ac - b^2 < 0$ )

$H = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ ,  $\det H > 0$  und  $a > 0 \Rightarrow$  quad. Form positiv definit.

Bei Funktionen in drei Veränderlichen hat man

$f(x_0 + h, y_0 + k, z_0 + l)$

$= f(x_0, y_0, z_0) + hf_x \dots + kf_y \dots + lf_z \dots$

$+ \frac{1}{2!} \underbrace{(h^2 f_{xx} + k^2 f_{yy} + l^2 f_{zz} + 2hk f_{xy} + 2hl f_{xz} + 2kl f_{yz})}_{\dots} + \varepsilon \zeta^2$

$$(h, k, l) \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{xy} & f_{yy} & f_{yz} \\ f_{xz} & f_{yz} & f_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = Q(h, k, l)$$

ist positiv definit wenn

$$\det \begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix} > 0, \det \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{xy} & f_{yy} \end{pmatrix} > 0 \text{ und } f_{xx} > 0.$$

$$\Leftrightarrow P(\lambda) = \det \begin{pmatrix} f_{xx} - \lambda & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{xy} & f_{yy} - \lambda & f_{yz} \\ f_{xz} & f_{yz} & f_{zz} - \lambda \end{pmatrix}$$

$$= \det \left[ \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{xy} & f_{yy} & f_{yz} \\ f_{xz} & f_{yz} & f_{zz} \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right]$$

$$= (-\lambda)^3 + (f_{xx} + f_{yy} + f_{zz})\lambda^2 - (***)\lambda + \det \dots$$

Hat dieses Polynom nur positive Nullstellen, ist  $Q(h, k)$  positiv definit.

## A Anhang

### Abbildungsverzeichnis

|    |   |    |
|----|---|----|
| 1  | Mögliche Interpolationsaufgabe . . . . .                      | 8  |
| 2  | Lagrange-Polynome $L_0(x) - L_3(x)$ . . . . .                 | 11 |
| 3  | Lagrange-Interpolationspolynom $p(x)$ . . . . .               | 11 |
| 4  | Intervallhalbierungsverfahren / Bisektion (Quelle: Wikipedia) | 25 |
| 5  | Iterationsverfahren . . . . .                                 | 25 |
| 6  | Iterationsverfahren funktioniert . . . . .                    | 28 |
| 7  | Iterationsverfahren funktioniert . . . . .                    | 28 |
| 8  | Iterationsverfahren funktioniert nicht . . . . .              | 28 |
| 9  | Iterationsverfahren funktioniert nicht . . . . .              | 28 |
| 10 | Streng monotone Funktion . . . . .                            | 29 |
| 11 | Newton-Verfahren . . . . .                                    | 30 |
| 12 | Newton-Verfahren: Negativ-Beispiel 1 . . . . .                | 31 |
| 13 | Newton-Verfahren: Negativ-Beispiel 2 . . . . .                | 31 |
| 14 | Ober- und Untersummen . . . . .                               | 33 |
| 15 | Mittelpunktsregel (Quelle: Wikipedia) . . . . .               | 34 |
| 16 | Sehnentrapezregel (Quelle:Wikipedia) . . . . .                | 35 |
| 17 | Simpson-Regel od. Keplersche Fassregel (Quelle:Wikipedia) .   | 36 |
| 18 | Beispiel für lineare Regression . . . . .                     | 40 |
| 19 | Beispiel für Regressionsgerade . . . . .                      | 41 |
| 20 | Hooksches Gesetz . . . . .                                    | 44 |
| 21 | Tangentialebene . . . . .                                     | 45 |